Análise Exploratória de Dados e Estimação de Densidade

Mineração de Dados

Ronaldo C. Prati[1]

[1]Universidade Federal do ABC (UFABC), ronaldo.prati@ufabc.edu.br

Introdução

Iniciando a análise

- Ao recebermos um conjunto de dados, normalmente, recebemos junto algumas informações (metadados por exemplo)
- A primeira coisa a se fazer é explorar os dados, suas características e identificar possíveis problemas.
- As **estatísticas descritivas** são normalmente utilizadas para uma análise inicial. As estatísticas descritivas normalmente utilizadas são agrupadas em:
  - Tendência central
  - Dispersão

Tendência Central

Uma tendência central (ou, normalmente, uma medida de tendência central) é um valor central ou valor típico para um certo atributo. As medidas de tendência central mais comuns são:

- A **média aritmética** (ou simplesmente, média) - a soma de todas as medições divididas pelo número de observações no conjunto de dados.
- A **mediana** é uma medida de localização do centro da distribuição dos dados, definida do seguinte modo: ordenados os elementos da amostra, a mediana é o valor (pertencente ou não à amostra) que a divide ao meio, isto é, 50% dos elementos da amostra são menores ou iguais à mediana e os outros 50% são maiores ou iguais à mediana.
- A **moda** é o valor que aparece com maior frequência no conjunto de dados.

Dispersão

Além da tendência central, outras medidas utilizadas para descrever tendência nos dados são as **medidas de dispersão**. Essas medidas nos ajudam a entender como os dados variam em torno da média.

Duas medidas de dispersão normalmente usadas são:

- a **variância**, que consiste na média do quadrado diferença entre cada valor do atributo e a sua média (vamos ver uma explicação mais detalhada a seguir).
- o **desvio padrão**, que é a raiz quadrada da variância.

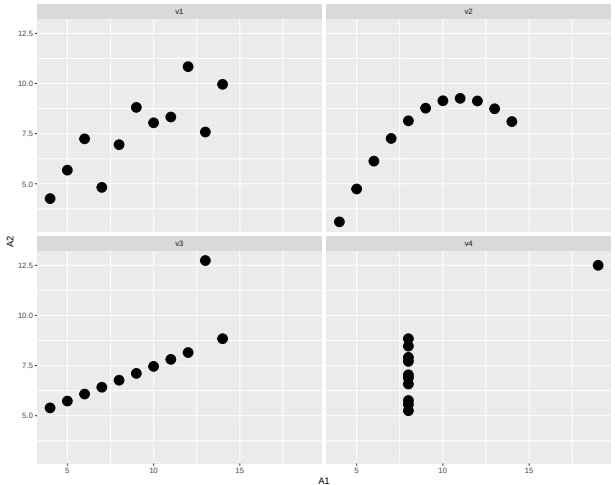
Quarteto de Anscombe

- Vamos começar por 4 bases de dados simples, cada uma com 11 objetos e 2 atributos. Essas bases de dados são chamadas de *Anscombe's Quartet'*.

	V1	V2	V3	V4
média(A1)	9,000	9,000	9,000	9,000
média(A2)	7,501	7,501	7,500	7,501
variância(A1)	11,000	11,000	11,000	11,000
variância(A2)	4,127	4,128	4,123	4,123
correlação(A1,A2)	0,816	0,816	0,816	0,817

Quarteto de Anscombe

- Estas bases de dados possuem características básicas idênticas. No entanto...

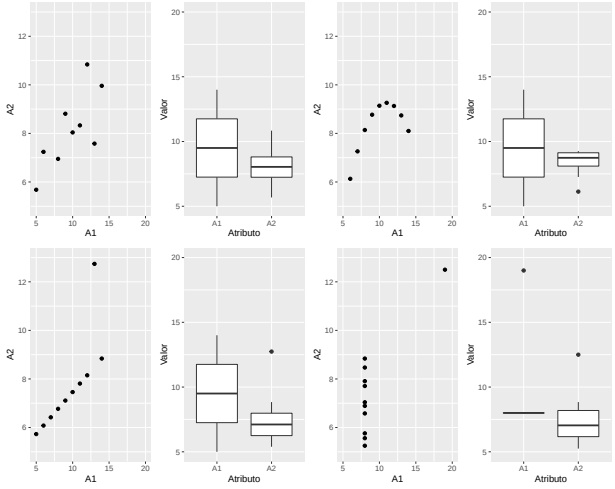


Estatísticas descritivas

- Outras opções além das estatísticas mais comuns (média, variância, mediana etc)
- Quartil
- Amplitude Interquartil (Interquartile Range)
- Estes são usualmente sumarizados em um *Boxplot*
  - Limites superior e inferior podem ser derivados do IQR (existem variações):
    - LI = 1º Quartil - 1.5 * IQR
    - LS = 3º Quartil + 1.5 * IQR

Gráficos

Boxplot



Histograma

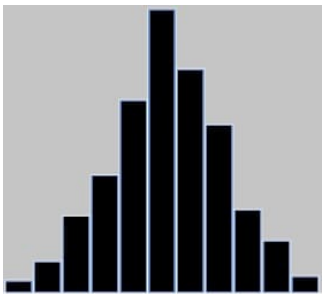
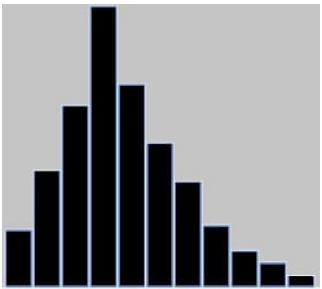
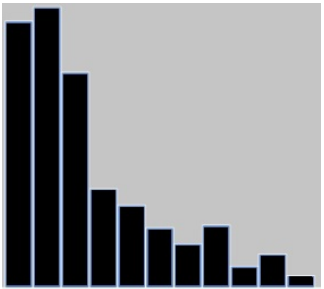
- Um histograma consiste em um gráfico de barras que demonstra uma distribuição de frequências, onde a base de cada uma das barras representa uma classe, e a altura a quantidade ou frequência absoluta com que o valor da classe ocorre.
- Tem como objetivo ilustrar como uma determinada amostra de dados ou população está distribuída, dispondo as informações de modo a facilitar a visualização da distribuição dos dados.

Histograma

- Ressalta a localização do valor central e da distribuição dos dados em torno deste valor central.
  - **Centralidade:** qual é o centro da distribuição? Onde é esperado que esteja a maioria das observações?
  - **Amplitude:** a distribuição normalmente contém observações entre quais valores? Qual é o ponto de máximo e o ponto de mínimo?
  - **Simetria:** será que devemos esperar a mesma frequência de pontos com valor alto e com valor baixo? Será que o processo é simétrico ou valores mais altos são mais raros?

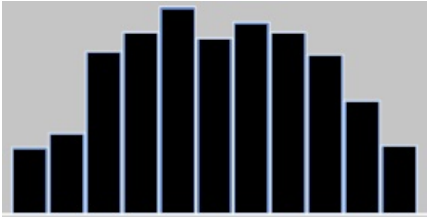
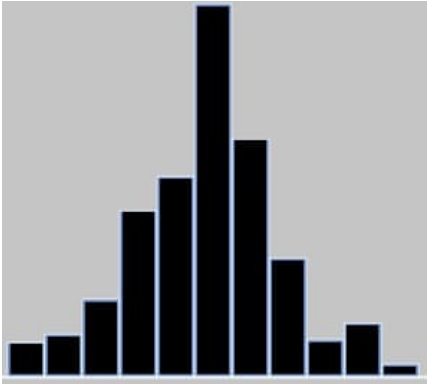
Histograma

- Simetria

Histograma Simétrico	Histograma Assimétrico	
		

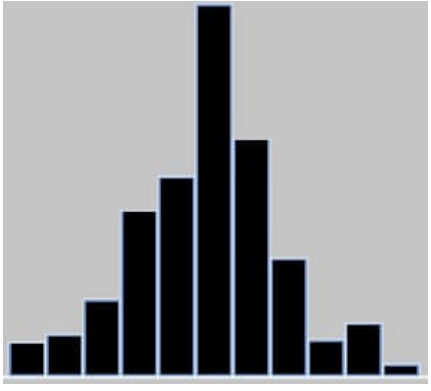
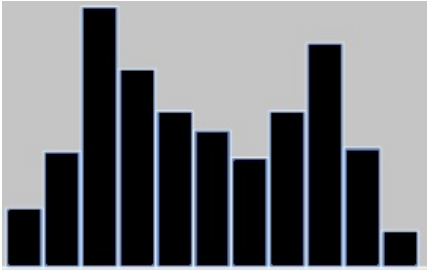
Histograma

- Amplitude

Achatado	Afunilado
	

Histograma

- Centralidade

Um pico	Dois Picos
	

Obliquidade

A obliquidade (*skewness*, em inglês) mede a assimetria das caudas da distribuição. Distribuições assimétricas que tem uma cauda mais "pesada" que a outra apresentam obliquidade. A obliquidade é definida como:

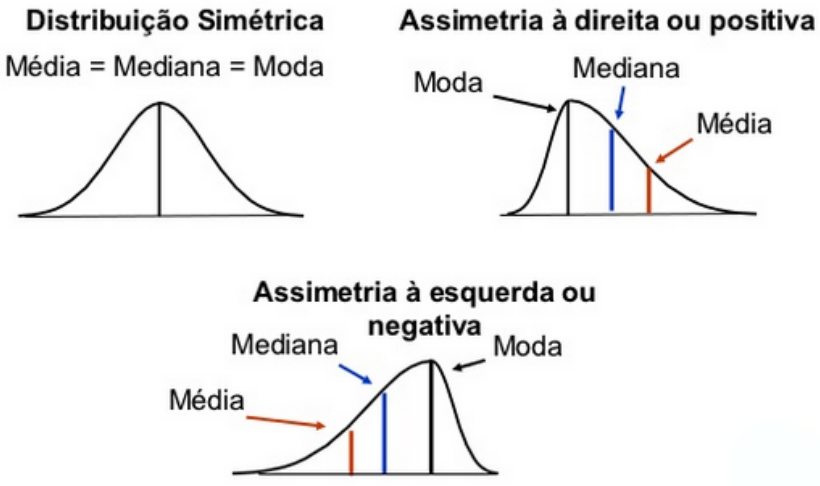
$$v = \frac{\mu_3}{\sigma^3}$$

em que μ_3 é o terceiro momento e σ é o desvio padrão.

Distribuições simétricas tem obliquidade zero. Assim:

- Se $v \gtrapprox 0$, então a distribuição tem uma cauda direita (valores acima da média) mais pesada
- Se $v \lessapprox 0$, então a distribuição tem uma cauda esquerda (valores abaixo da média) mais pesada
- Se $v \approx 0$, então a distribuição é aproximadamente simétrica

Obliquidade



Curtose

- A **curtose** ou achatamento mede aconcentração ou dispersão dos valores de um conjunto de dados em relação às medidas detendência central em uma distribuição de frequências conhecida (a distribuição Normal).
- A distribuição dos dados pode ser classificada em três classes:
  - Mesocúrtica: a distribuição é similar à Normal
  - Leptocúrtica: A distribuição apresenta uma curva de frequências mais fechada que a da distribuição Normal.
  - Platicúrtica: distribuição apresenta uma curva de frequências mais aberta que a da distribuição Normal.

Curtose

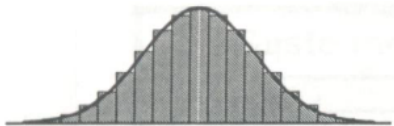
A curtose pode ser definida por

$Kurt = \frac{\mu_4}{\sigma^4} + (-3)$,

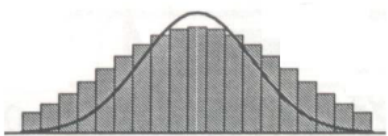
em que μ_4 é o quarto momento e σ é o desvio padrão.

- Se $Kurt \approx 0$, então tem o mesmo achatamento que a distribuição normal (mesocúrtica)
- Se $Kurt \gtrapprox 0$, então a distribuição em questão é mais alta (afunilada) e concentrada que a distribuição normal (leptocúrtica), ou que a distribuição tem caudas pesadas
- Se $Kurt \lessapprox 0$, então a função de distribuição é mais "achatada" que a distribuição normal (platicúrtica)

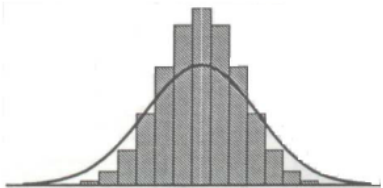
Curtose



Distribuição mesocúrtica



Distribuição platicúrtica



Distribuição leptocúrtica

Densidade

Estimando densidade

- Histogramas são uma forma útil de inspecionar a distribuição dos dados. Entretanto, em alguns casos, precisamos de uma estimativa da densidade
- Estimar densidade é necessário em diversos algoritmos utilizados em MD.
- Conforme veremos durante o curso, boa parte dos algoritmos buscam aproximar a função $p(Y|\mathcal{X})$ em que Y é a saída desejada e $\mathcal{X}$ são os dados.

Estimando densidade

- Existem duas abordagens principais para se estimar densidade:
  - Paramétrica: assume uma determinada forma (distribuição) para a variável
  - Não-paramétrica: não é baseada em uma premissa sobre o formato da distribuição
    - Flexibilidade tem um custo
    - Pode se tornar inviável quando se tem muitos atributos (voltarei nesse assunto)

Abordagem Paramétrica

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Necessário saber *a priori* a distribuição dos dados (sua forma)
  - os parâmetros são estimados baseando-se nos dados observados
- Vamos cobrir nessa aula apenas a distribuição Normal, mas os conceitos são aplicáveis às demais
  - quase sempre assume-se normalidade, embora nem sempre os dados suportem essa premissa

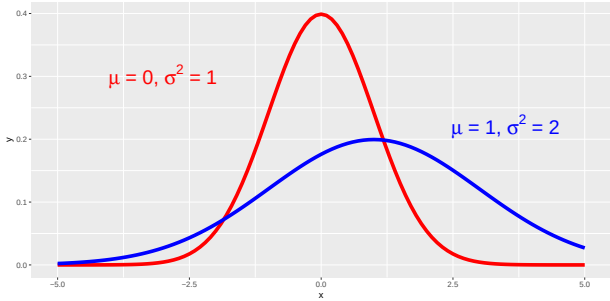
Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Lembrando a equação que define a distribuição Normal

$$f(x\ ;\ \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\ e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

- Dois parâmetros definem a distribuição:
  - média (μ): define centro
  - variância (σ^2): define concentração (~68% dos valores estão a 1 desvio padrão (σ) da média)

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica



Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Temos um conjunto de pontos $\{x_i\}_{i=1}^{N}$. Como encontrar os valores de μ e σ^2 que melhor se ajustam aos dados?
- **Estimador de Máxima Verossimilhança** (*Maximum Likelihood Estimate*)
  - Normalmente mais simples que outras alternativas
  - Boas propriedades de convergência

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

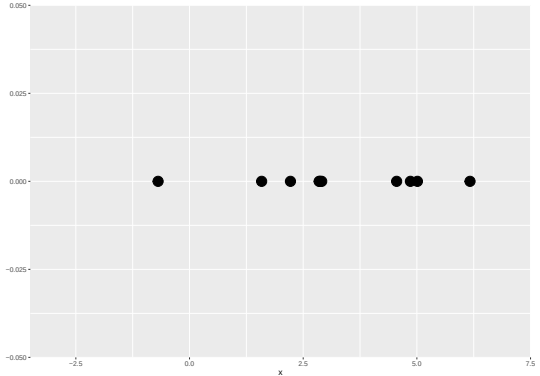
- Princípios gerais
  - Seja $L(\theta)$ a função de verossimilhança (*likelihood*)

$$L(\theta) = \prod_{n=1}^{N} p(x_n; \theta)$$

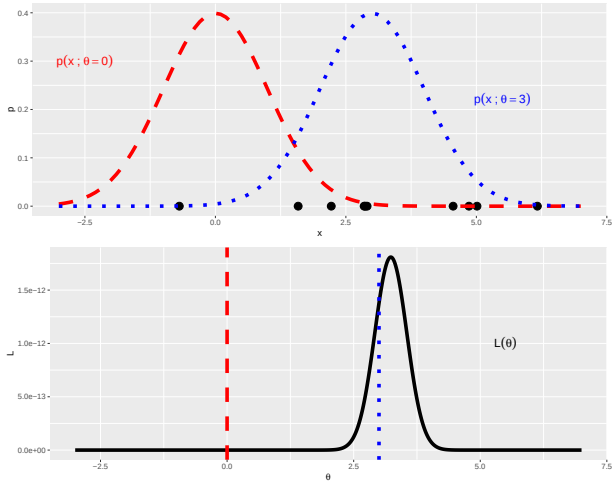
  - L não é uma função de densidade de probabilidades, e sim uma função de θ em relação às amostras

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Suponha o seguinte conjunto de pontos
  - Vamos assumir que sabemos a variância (σ^2) mas não a média
  - Neste caso, $\theta = \{\mu\}$



Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

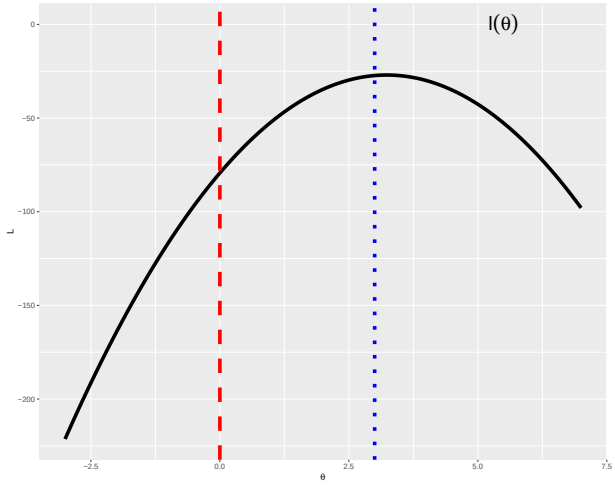


Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Normalmente é mais fácil trabalhar com o log da função de verossimilhança
  - Log é uma função monotônica (preserva a ordem), logo o problema de maximização é equivalente

$$\log L(\theta) = l(\theta) = \log \prod_{n=1}^{N} p(x_n; \theta) = \sum_{n=1}^{N} \log p(x_n; \theta)$$

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica



Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- O estimador de máxima verossimilhança corresponde ao parâmetro θ que maximiza a função de verossimilhança (ou de log verossimilhança)

$$\theta_{ML} = \underset{\theta}{\text{argmax}} l(\theta)$$

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Para encontrar θ_{ML} resolvemos $l'(\theta) = 0$
  - Condições de segunda ordem também devem ser verificadas ($l''(\theta) < 0$)
  - Existem alguns cuidados em relação aos limites do espaço de parâmetros
  - Lembre-se que é uma *estimativa*, garantias apenas no limite ao infinito de número de amostras

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Vamos ver o processo na distribuição normal ($\theta = \{\mu, \sigma^2\}$):

$$p(x\ ;\ \mu, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\ e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\ln p(x\ ;\ \mu, \sigma^2) = \ln(1) - \frac{1}{2}\ln\left(2\pi\sigma^2\right)\ - \frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2$$

$$\ln p(x\ ;\ \mu, \sigma^2) = -\frac{1}{2}\ln\left(2\pi\sigma^2\right)\ - \frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2$$

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Substituindo na equação do likelihood:

$$l(\theta) = \sum_{n=1}^{N} \ln p(x_n; \theta) = \sum_{n=1}^{N} -\frac{1}{2} \ln \left(2\pi\sigma^2\right) - \frac{1}{2\sigma^2}(x_n - \mu)^2$$

$$l(\theta) = -\frac{N}{2} \ln (2\pi) - \frac{N}{2} \ln \left(\sigma^2\right) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu)^2$$

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Temos que derivar em relação à média:

$$\frac{dl(\theta)}{d\mu} = -\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{n=1}^{N}\frac{d\left[(x_n-\mu)^2\right]}{d\mu} \quad \text{[regra da cadeia:} h'(g(x))g'(x)\text{]}$$

$$\frac{dl(\theta)}{d\mu} = -\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{n=1}^{N}2(x_n-\mu)\cdot -1 = \frac{1}{\sigma^2}\sum_{n=1}^{N}(x_n-\mu)$$

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Para encontrar a estimativa de máxima verossimilhança devemos igualar a derivada a 0:

$$\frac{dl(\theta)}{d\mu} = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sigma^2}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \mu) = 0$$

$$\frac{1}{\sigma^2}\left[\left(\sum_{n=1}^{N} x_n\right) - N\mu\right] = 0, \text{igual a zero se } \left(\sum_{n=1}^{N} x_n\right) - N\mu = 0$$

$$\sum_{n=1}^{N} x_n = N\mu \Rightarrow \mu = \frac{\sum_{n=1}^{N} x_n}{N}$$

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Falta a estimativa para a variância da distribuição
  - Para simplificar considere $\theta_1 = \sigma^2$

$$l(\theta) = -\frac{N}{2}\ln(2\pi) - \frac{N}{2}\ln(\theta_1) - \frac{1}{2\theta_1}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \mu)^2$$

$$\frac{dl(\theta)}{d\theta_1} = -\frac{N}{2\theta_1} + \frac{1}{2(\theta_1)^2}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \mu)^2 \quad \left[\frac{d\ln(x)}{dx} = \frac{1}{x}\right]$$

$$\frac{dl(\theta)}{d\theta_1} = \frac{1}{2\theta_1}\left[-N + \frac{1}{\theta_1}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \mu)^2\right]$$

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Para encontrar a estimativa de máxima verossimilhança devemos igualar a derivada a 0 (lembrando que $\theta_1 = \sigma^2 \wedge \sigma^2 > 0$):

$$\frac{dl(\theta)}{d\theta_1} = 0 \Rightarrow \frac{1}{2\theta_1}\left[-N + \frac{1}{\theta_1}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \mu)^2\right] = 0$$

- Igual a zero se:

$$-N + \frac{1}{\theta_1}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \mu)^2 = 0 \Rightarrow \sigma^2 = \theta_1 = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \mu)^2$$

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Note que μ nesse caso corresponde à estimativa da média obtida (estamos maximizando em relação às duas quantidades)
- Essa abordagem não é perfeita
  - o estimador da variância é *enviesado* (o valor do parâmetro é subestimado)
  - o estimador sem viés corresponde a:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu)^2$$

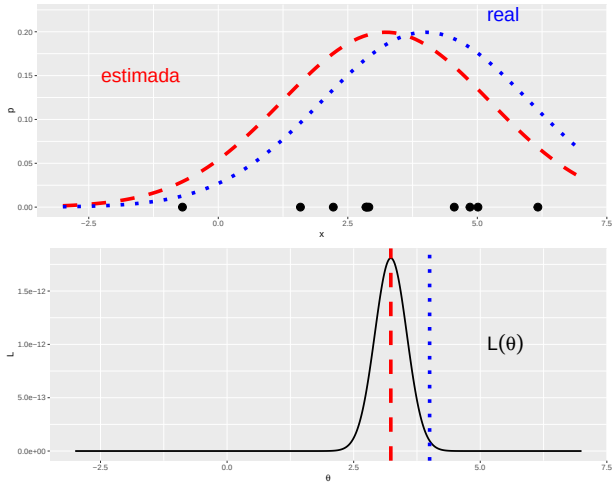
  - neste caso específico, o problema não é preocupante
    - assumindo que o número de amostas (N) é grande

Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Voltando ao nosso exemplo, temos:
  - $\hat{\mu} = 3.23$
  - $\hat{\sigma}^2_{\text{biased}} = 3.57$
  - $\hat{\sigma}^2_{\text{unbiased}} = 3.97$
  - μ_{real} 4.00
  - σ^2_{real} 2.00

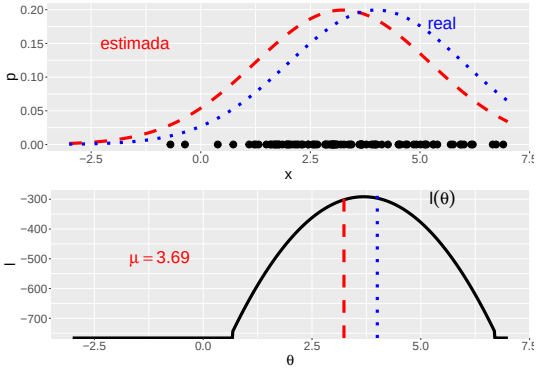
Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

- Para simplificar a visualização, voltamos a assumir que a variância é conhecida



Estimando densidade - Abordagem Paramétrica

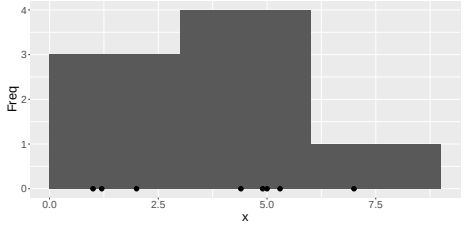
- Observe como devido ao pequeno número de amostras os parâmetros corretos possuem valor baixo de verossimilhança, veja o que acontece com 100 amostras ao invés de 10



Abordagem Não-paramétrica

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

- Quando não conhecemos a distribuição geradora dos dados ou não temos um bom palpite
  - Se os dados não suportam o palpite, as estimativas de densidade podem ser muito ruins
  - Lembre-se, o primeiro passo deve ser sempre conhecer melhor os dados que serão analisados
- Lembram dos histogramas? Eles serão o ponto inicial desse tópico



Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

- Podemos extrair uma estimativa de densidade a partir do histograma

$$\hat{p}(x) = \frac{\text{número de objetos na barra}}{Nh}$$

  - N: número total de objetos
  - h: largura da barra (volume)
- Desvantagens:
  - Descontinuidades
  - Densidade igual por toda a barra, independente da disposição dos objetos

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

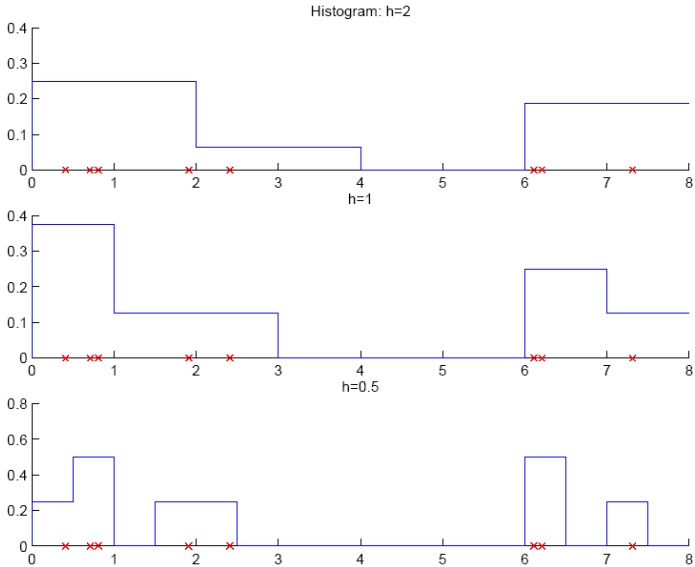


Figure 1: Estimativa histograma

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

- Podemos melhorar a estimativa considerando regiões de vizinhança
  - Abordagem também conhecida como *Parzen Window*
  - Necessário definir uma noção de distância
  - Inclusão de uma função de *kernel*

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{Nh} \sum_{n=1}^{N} K\left(\frac{x - x_n}{h}\right)$$

- *Kernel* hiper-cubo unitário centrado na origem

$$K(u) = \begin{cases} 1, \text{se } |u| < 1/2 \\ 0, \text{caso contrário} \end{cases}$$

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

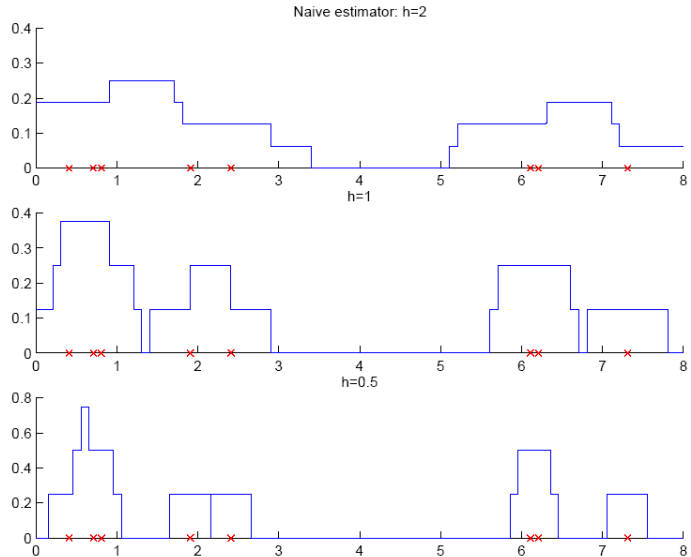


Figure 2: Estimativa hiper-cubo unitário

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

- Utilizando um *kernel* suave obtemos estimativas mais apropriadas, o mais comum é o *kernel* gaussiano
  - Note que isso não significa que estamos assumindo que os dados foram gerados por uma distribuição Normal

$$K(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} exp\left[-\frac{u^2}{2}\right]$$

  - Podemos simplificar adotando um corte:
    - $K(\cdot) = 0$ se $|x - x_n| > 3h$

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

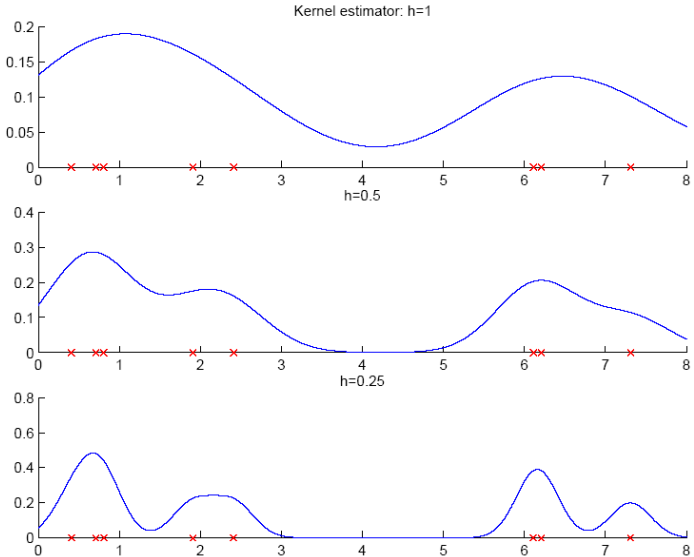


Figure 3: Estimativa kernel gaussiano

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

- Outros *kernels* podem ser utilizados, contanto que o pico seja em $u = 0$ e diminua conforme $|u|$ aumenta.
  - Para ser uma função de densidade legítima deve satisfazer:

$$\int K(u)du = 1$$

$$K(u) \geq 0$$

- Ainda temos que definir um parâmetro de largura (h) apropriado
  - h pequeno estimativa fica suscetível a ruído nos dados
  - h grande estimativa fica artificialmente suavizada

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

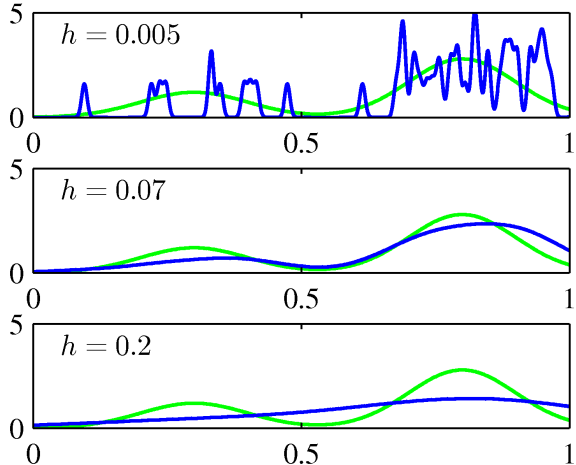


Figure 4: Influência parâmetro h

- Curva verde corresponde ao modelo gerador dos dados

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

- Como definir h?
  - Existem heurísticas adotadas em pacotes estatísticos (Ex: R), baseadas em premissas sobre os dados
  - Funcionam bem se as premissas (Ex: Normalidade) sob as quais foram desenvolvidadas forem satisfeitas
  - No caso geral, esse se torna um hiper-parâmetro a ser otimizado

Estimando densidade - Abordagem Não-paramétrica

- Em uma abordagem diferente, ao invés de limitarmos o volume (via h) tornamos o volume grande o suficiente para conter um mínimo de amostras
  - Regiões de alta densidade obtém h pequeno evitando a suavização artificial
  - Regiões de baixa densidade obtém h grande evitando ruído
  - Esta abordagem é chamada de *k-Nearest Neighbor Estimator*

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{N d_k(x)} \sum_{n=1}^{N} K\left(\frac{x - x_n}{d_k(x)}\right)$$

$d_k(x)$ é a distância do k-ésimo vizinho mais próximo de x

Referências

P. Tan, M. Steinbach e V. Kumar, Introduction to Data Mining. **Capítulo 3**

D. Hand, H. Manilla e P. Smith. Principles of Data Mining. **Capítulo 3**

E. Alpaydin, Introduction to Machine Learning. **Seção 8.2**

C. Bishop. Pattern Recognition and Machine Learning. **Seções 1.2.4 e 2.5.1**

R. Duda, P. Hart e D. Stork. Pattern Classification. **Seção 3.2**